

Индустриальное приложение: Система моделирования кристаллических решёток с дефектами

Попов Владимир, Б01-411

1 Постановка решаемой задачи

Основная цель: Прогнозирование стабильных конфигураций кристаллических решёток материалов при наличии точечных и линейных дефектов под воздействием внешних условий (температура, механическое напряжение, радиационное облучение). Будем рассматривать решение для небольшой исследовательской группы из 10 человек в каком-нибудь НИИ.

Конкретные подзадачи:

- Генерация начальных конфигураций решётки с заданным типом и концентрацией дефектов
- Минимизация полной потенциальной энергии системы
- Расчёт макроскопических свойств: модули упругости, энергия образования дефекта и т.д.
- Визуализация эволюции структуры
- Хранение и сравнение результатов для различных материалов и условий

Актуальность: Ускорение разработки радиационно-стойких материалов для ядерной энергетики и космической техники; оптимизация легирования полупроводников; исследование свойств новых материалов.

За основу взят этот проект по моделированию кристаллических решёток.

2 Размерности данных

Большую часть объёма занимают конфигурации и траектории. Метаданные: материал, тип дефекта, параметры расчёта — очень мало.

Таблица 1: Оценка объёмов данных

Тип данных	Оценка объёма	Пояснение
Одна атомная конфигурация суперячейки	0.5 MB–5 MB	Координаты ($3 \times \text{float64}$) + тип атома. Рассматриваем около 10^4 – 10^6 , в среднем столько можно за адекватное время смоделировать.
Траектория релаксации (100 шагов)	(100 50 MB–500 MB	Последовательность конфигураций для анимации
База данных (активная)	2 TB–5 TB	При 500–1000 конфигурациях на пользователя в год $\times 10$ человек
Архив результатов	10 TB–20 TB	Долгосрочное хранение за 3–5 лет

3 Используемые вычислительные методы

3.1 Потенциал взаимодействия

Для благородных газов и простых металлов применяется потенциал Леннарда-Джонса:

$$V(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right], \quad (1)$$

где ε — глубина потенциальной ямы, σ — расстояние, на котором $V(r) = 0$.

Для ионных кристаллов используется потенциал Ми:

$$V(r) = \frac{A}{r^n} - \frac{B}{r^m}, \quad n > m, \quad (2)$$

где первый член описывает отталкивание, второй — притяжение.

3.2 Молекулярная динамика

Моделирование движения атомов во времени путём численного решения уравнений Ньютона:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i = -\nabla_{\mathbf{r}_i} E. \quad (3)$$

Интегрирование выполняется алгоритмом Верле:

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t - \Delta t) + \frac{\mathbf{F}_i(t)}{m_i} \Delta t^2. \quad (4)$$

Подходит для моделирования тепловых эффектов. Нужно бы ещё внести модель термостата.

Чтобы не считать за квадрат, можно ограничить радиус, в котором имеет смысл про-

изводить расчёты, за которым потенциал близок к нулю.

4 Используемое программное и аппаратное обеспечение

4.1 Программная архитектура

Таблица 2: Компоненты программной архитектуры

Компонент	Реализация	Пояснения
GUI	PyQt5 + OpenGL	PyQt5 предоставляет виджеты интерфейса; 3D-рендеринг выполняется на GPU через модуль <code>QtOpenGL</code>
Бэкенд	Python 3 + C++ (OpenMP)	Управление логикой и БД — на Python; тяжёлые расчёты (силы, градиенты) — на C++ с параллелизацией через OpenMP (на CPU, потому что атомов не так много в районе 10^6 , GPU, ,)
База данных	PostgreSQL	Интеграция с Python (<code>psycopg2</code>) и C++ (<code>libpqxx</code>); хранение метаданных и путей к бинарным файлам

4.2 Аппаратная платформа

Таблица 3: Конфигурация аппаратной платформы

Компонент	Конфигурация	Пояснения
Вычислительный сервер	4 CPU на $\sim 28 - 32$ ядра, 4 NVIDIA GPU 512 GB RAM	Централизованный сервер для 5–10 одновременных пользователей; GPU используются для рендеринга, CPU - для расчётов
Хранилище	Что-то вместимостью порядка 50 ТВ и не быстрое, и что-то вместимостью 10 ТВ побыстрее.	База данных активных и архивных вычислений и вообще склад всякого.
Клиентские станции	16 GB RAM, GPU с поддержкой OpenGL	Достаточно для отображения GUI; тяжёлые расчёты выполняются на сервере

5 Полученные результаты

Разработана целостная программно-аппаратная платформа для исследовательской группы по материаловедению около 10 человек, обеспечивающая:

1. Моделирование эволюции кристаллических дефектов в системах из 10^4 – 10^6 атомов с использованием молекулярной динамики на основе потенциалов Леннарда-Джонса и Ми.
2. Совместную работу через централизованную архитектуру: сервер с многоядерными CPU и GPU обрабатывает расчёты и рендеринг; данные хранятся в СУБД PostgreSQL.
3. Графический интерфейс на базе PyQt5 с аппаратно ускоренной 3D-визуализацией через OpenGL.